

UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

Peperiksaan Semester Pertama
Sidang Akademik 2003/2004

Oktober 2003

KAA 506 – Komputer Dalam Kimia

Masa: 3 jam

Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi EMPAT muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.

Jawab LIMA soalan. Jika calon menjawab lebih daripada lima soalan, hanya lima soalan pertama mengikut susunan dalam skrip jawapan akan diberi markah.

1. (a) Mengapakah sistem binari dipilih dalam sistem perkomputeran?

(3 markah)

- (b) Apakah nilai output jika nilai 0101 adalah input bagi

- (i) OR diikuti dengan NOR.
- (ii) AND diikuti dengan NAND.
- (iii) NOT diikuti dengan XOR.
- (iv) AND diikuti dengan XOR.
- (v) XOR diikuti dengan XAND.
- (vi) OR diikuti dengan NAND.
- (vii) AND serentak dengan OR diikuti dengan NOT

Sila lukis rajah yang sesuai untuk jawapan anda.

(7 markah)

(c) Buatlah carta alir bagi perkara-perkara berikut ;

- (i) Pengawalan, pengambilan data dan pengiraan takat akhir pentitratan swa-penunjuk.
- (ii) Pengawalan, pengambilan data dan pengiraan kepekatan anu analisis suntik alir.

(10 markah)

2. (a) Terangkan bagaimanakah perkara-perkara berikut boleh disempurnakan?

- (i) Menukarkan voltan suatu pengesan kenilai digital.
- (ii) Menggandakan voltan suatu pengesan sebanyak sepuluh kali ganda.
- (iii) menukarkan nilai digital kenilai analog.
- (iv) Mengikut perubahan kadar suatu tindak balas.
- (v) mengira keluasan puncak suatu kromatogram secara berterusan.

(5 markah)

(b) Apakah persiapan dan alasan yang perlu untuk megautomasikan sepenuhnya suatu makmal rutin yang mempunyai peralatan-peralatan neraca, spektrometer ultralembayung-nampak, pentitrat automatik, spektrometer penyerapan dan pemancaran atom bagi analisis pelbagai sampel?

(15 markah)

3. Bincangkan dengan terperinci apakah kebaikan pengautomatikan sepenuhnya dalam suatu makmal pengawalan mutu?

(20 markah)

- 3 -

4. (a) Berikut adalah persamaan Schrödinger yang menjadi asas kepada penyelesaian kaedah mekanik kuantum.

$$H\Psi = E\Psi$$

bagi

$$H = \underbrace{\frac{-\hbar^2}{8\pi^2} \sum_A^{\text{nukleus}} \frac{1}{M_A} \nabla_A^2}_{\text{kinetik nukleus}} + \underbrace{\sum_A^{\text{elektron}} \nabla_a^2 - e^2}_{\text{kinetik elektron}} + \underbrace{\sum_A^{\text{nukleus}} \sum_a^{\text{elektron}} \frac{Z_A}{r_{Aa}}}_{\text{potensi nukleus / elektron}} + \underbrace{e^2 \sum_{A>B}^{\text{nukleus}} \sum_B \frac{Z_B Z_B}{R_{AB}}}_{\text{potensi nukleus / nukleus}} + \underbrace{e^2 \sum_{a>b}^{\text{elektron}} \sum_b \frac{1}{r_{ab}}}_{\text{potensi elektron / elektron}}$$

Dengan menggunakan penghampiran tertentu yang dipakai dalam penyelesaian, persamaan Schrödinger, tulis semula persamaan di atas.

(10 markah)

- (b) Berikan dua kaedah pengoptimuman geometri yang biasa digunakan dan bincangkan perbezaan antara kaedah tersebut dalam menentukan struktur minima global (global minimum.)

(10 markah)

5. Nyatakan perbezaan dan pembaharuan yang terdapat dalam kaedah teori fungsi densiti (DFT) berbanding kaedah korelasi (correlated method).

Bandingkan kaedah-kaedah ini dengan membincangkan teori asasnya, ketepatan serta aplikasi, keperluan komputasi dan kemampuan kaedah tersebut dalam meramalkan tenaga pembentukan.

(20 markah)

6. (a) Nyatakan kaedah yang sesuai digunakan bagi permasalahan berikut. Beri alasan anda.
- (i) Mekanisme tindak balas virus HIV dengan suatu drug.
 - (ii) Pengoptimuman geometri bagi struktur $[\text{Mn}(\text{CN})_6]^{4-}$.
 - (iii) Pengiraan tenaga pengikatan eter mahkota, 18C6, dengan ion kalium.

(12 markah)

- (b) Lukis struktur molekul (tanpa mengikut skala) berdasarkan format Z-matriks di bawah.

C1						
C2	1	1.54				
H3	2	1.09	1	120.0		
H4	1	1.09	2	109.5	3	180.0
H5	1	1.09	2	109.5	3	-60.0
H6	1	1.09	2	109.5	3	60.0
O7	2	1.23	1	120.0	4	0.0

(Label setiap atom dan tunjukkan kedudukan atom dengan jelas)

(8 markah)

oooOooo